

# Phase-field 法による再結晶組織予測

京都工芸繊維大学 高木知弘

## Recrystallization Microstructure Prediction by Phase-Field Method

Tomohiro TAKAKI

### 1. はじめに

再結晶は冷間加工後の焼きなましや熱間加工時に生じ、製品の特性を左右する重要な現象である。再結晶粒成長の駆動力は転位の蓄積エネルギーであり、再結晶核生成は転位密度の高いところから生じるため、再結晶組織を精度良く予測するためには、塑性加工時の変形不均一性の評価と、変形組織に基づく再結晶核生成と再結晶粒成長の評価が必要となる。塑性加工時の変形組織はEBSD法などにより実験的に取得する方法があるが、観察組織から蓄積エネルギー分布を見積もる手法は構築されているとは言えず、また実験を用いると体系的な評価が困難となる。そのため、現時点では結晶塑性論に基づく有限要素法が変形組織予測手法として最も強力なツールであると考えられる。また、再結晶粒成長モデルとしては、時間・空間的に定量的な評価が可能であるPhase-field法が最も将来性のある手法である。

以上のような背景の下、著者は結晶塑性論とPhase-field法を用いた再結晶組織予測モデルの構築を行っている。ここでは、Multi-phase-field (MPF) 法を用いた統一的サブグレイン成長モデルによる変形組織に基づく静的再結晶モデルと、同MPF法を用いた熱間加工過程の動的再結晶モデルを紹介し、今後の展開と問題点について論じる。

### 2. MPF シミュレーション

再結晶粒成長の評価にはSteinbachら<sup>1)</sup>が提案したMPFモデルを用いる。他にも幾つかのMPF法が提案されているが、本手法は式中の係数と物性値の関係が明確であるため定量的な評価が可能であり、また、Kimら<sup>2)</sup>のアルゴリズムと併用することで極めて効率的な数値シミュレーションが可能となるため、現時点では最も有用なMPFモデルであろうと考えている。

**2・1 MPF モデル** Steinbachら<sup>1)</sup>が提案したMPFモデルにおいて、Phase field  $\phi_i$  の時間発展方程式は次式のように表すことができる。

$$\dot{\phi}_i = - \sum_{j=1}^n \frac{2M_{ij}^{\phi}}{n} \left[ \sum_{k=1}^n \left\{ (W_{ik} - W_{jk}) \phi_k + \frac{1}{2} (a_{ik}^2 - a_{jk}^2) \nabla^2 \phi_k \right\} - \frac{8}{\pi} \sqrt{\phi_i \phi_j} \Delta E_{ij} \right] \quad (1)$$

$\phi_i$  は  $i$  番目の粒内で1、他粒内で0、粒界で  $0 < \phi_i < 1$  の値をとる phase field であり、数値格子点上で  $\phi_i > 0$  となる  $n$  個の phase field のみ計算の対象とする。勾配係数  $a_{ij}$ 、エネルギー障壁  $W_{ij}$ 、phase field モビリティ  $M_{ij}^{\phi}$  は次式により粒界エネルギー  $\gamma_{ij}$ 、界面幅  $\delta$ 、粒界モビリティ  $M_{ij}$  と関係付けることができる。

$$a_{ij} = \frac{2}{\pi} \sqrt{2\delta\gamma_{ij}}, \quad W_{ij} = \frac{4\gamma_{ij}}{\delta}, \quad M_{ij}^{\phi} = \frac{\pi^2}{8\delta} M_{ij} \quad (2)$$

式(1)の右辺括弧内の第1項は粒界におけるエネルギー障壁項、

第2項は勾配項、第3項は駆動力項である。

**2・2 MPF 高速化アルゴリズム** MPF法の欠点は、1つの結晶粒を1つの phase field 変数で表すため、粒成長問題など多くの結晶粒を用いる場合、計算容量および計算速度において限界があることであった。Kimら<sup>2)</sup>は、ある数値格子点においては多くの phase field 変数が零であり、SteinbachのMPFモデルが  $\sum \phi = 1$  を満たしかつ界面領域が明確に決められることに着目し、MPF法を効率的に解くためのアルゴリズムを提案した。以下そのアルゴリズムの手順である<sup>3)</sup>。

- ①  $n$  個の phase field  $\phi$  変数に対して式(1)を解く。
- ② 前のステップで  $\phi = 0$  であり、計算された増分量が負の phase field を phase field グループから外し①に戻る。
- ③ phase field を値の大きい順に並び替え、大きい方から  $n_{\phi}$  個までを保存する。
- ④  $n_{\phi}$  個の phase field が  $\sum \phi = 1$  を満たすように  $\phi$  を調整する。
- ⑤ 最近接格子点の  $\phi$  が零でなく、今考えている格子点の  $\phi$  が零の場合は、その phase field を解く phase field グループに追加する。
- ⑥ 式(1)の  $n$  を更新する。

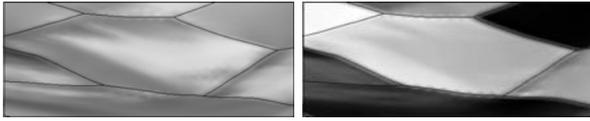
以上の手順の中で、 $n_{\phi}$  は各格子点で保存する  $\phi$  の最大の数であり、2次元問題の場合5程度にしておけば十分である。

以上のように、式(1)で表されるMPF法と効率的なアルゴリズムを用いることで、粒成長シミュレーションを定量的にかつ効率的に行うことができる。

### 3. 静的再結晶 (Static Recrystallization : SRX)

冷間加工後の焼きなまし中に生じる静的再結晶の数値モデルは大きく2つに分けることができる。一つは、核生成条件を設定し蓄積エネルギーを駆動力とするモデル<sup>4)</sup>、もう一つは、変形時のサブグレイン組織からスタートする粒成長モデル<sup>3)</sup>である。再結晶は駆動力が小さいため、前者のモデルを用いると数値格子サイズを大きくすることができるが、核生成条件が必要でありシミュレートされる組織は核生成条件に大きく左右される。後者はサブグレイン組織を形成し易い高積層欠陥エネルギー材にしか適用できないが、パルジングや異常粒成長による自発的な核生成が可能である。ここでは、後者のモデルと結果を紹介する。

まず、結晶塑性有限要素シミュレーションにより多結晶体の塑性変形をシミュレートする。次に、計算された蓄積エネルギーと結晶方位から変形時のサブグレイン組織を予測する<sup>3)</sup>。図1は多結晶モデルを50%圧縮変形させた場合の蓄積エネルギーと結晶方位の分布である。これらの結果に基づいて予測したサブグレイン組織が図2(a)である。図1(a)と図2(a)を比較すると、蓄積エネルギーの高い領域に細かいサブグレインが配置されており、適切な変形サブグレイン組織予測が行えていることが確認できる。



(a) Stored energy (0.26-1.05 MPa) (b) Crystal orientation (0- $\pi$ )  
Fig.1 Results of crystal plasticity FE simulation (50% compression)

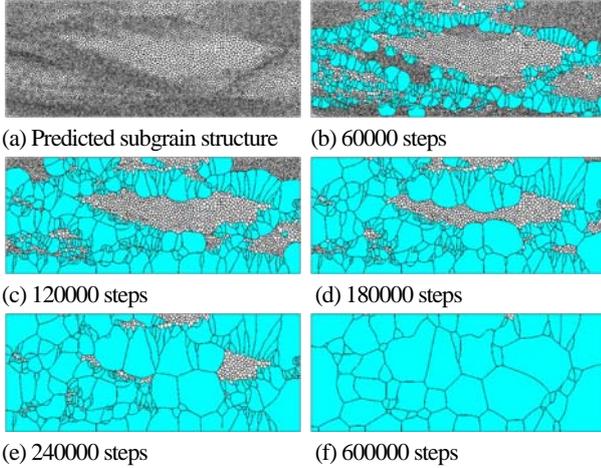


Fig.2 Microstructure evolutions during MPF simulation

図2(a)を初期構造とし、粒成長シミュレーションを行った結果が図2(b)-(f)である。粒界エネルギーと粒界モビリティは方位差依存性を導入しているため<sup>3)</sup>、図1(b)と図2(b)を比べると分かるように、初期粒界と粒内で方位差が生じたところが核生成サイトとなり、再結晶粒が大きく成長していることが分かる。また、中央の粒の右側は蓄積エネルギーが小さくサブグレインが大きいため、再結晶化が遅いことが分かる。

以上のように、本手法を用いることで変形組織を反映した自発的な核生成を可能とする再結晶組織予測が可能であることが分かる。

#### 4. 動的再結晶 (Dynamic Recrystallization : DRX)

低中積層欠陥エネルギーを有する金属材料を熱間で加工すると、塑性加工による転位の蓄積による硬化と再結晶粒の生成・成長による軟化が同時に現れる動的再結晶が生じる。動的再結晶は静的再結晶に比べて現象が複雑であるため、数値モデルはあまり多く発表されていないようである。ここでは、転位密度の発展を Kocks-Meching モデルにより、再結晶粒成長を MPF モデルにより表現する動的再結晶(MPF-DRX)モデル<sup>5)</sup>を紹介する。

MPF-DRX モデルの手順は次の通りである。

- ① 解析領域内の転位密度を一定  $\rho = \rho_0$  とする。
- ② Kocks-Meching モデル  $d\rho/d\varepsilon = k_1\rho^{1/2} - k_2\rho$  によりひずみ増分  $\Delta\varepsilon$  に対する転位密度増分  $\Delta\rho$  から転位密度を計算する。
- ③ 粒界上の転位密度が核生成臨界値に達したら核生成速度に応じて再結晶核を配置する。その際、核内の転位密度は初期値  $\rho = \rho_0$  とする。
- ④ MPF 法により粒成長過程をシミュレートする。粒成長の駆動力は隣合う粒の蓄積エネルギー差である。
- ⑤ 解析領域内の平均転位密度  $\rho_{ave}$  から Bailey-Hirsch モデル  $\sigma = \alpha\mu b\rho_{ave}^{1/2}$  を用いて巨視的応力を算出する。

図3と図4は、初期粒径  $D_0 = 30 \mu\text{m}$  と  $250 \mu\text{m}$  の場合の再

結晶組織発展を示している。 $D_0 = 30 \mu\text{m}$  では完全にランダムな核生成が見られるが、 $D_0 = 250 \mu\text{m}$  では典型的なネック構造を確認することが出来る。図5は巨視的な応力-ひずみ関係と粒サイズの変化に対する初期粒径の影響を示している。粒サイズが小さいと複数ピークを有する応力-ひずみ関係が確認されるが、粒サイズが大きくなると単一ピークを有する曲線となることが分かる。また、粒サイズの変化より、定常再結晶粒サイズは初期粒径に依存しないことが分かる。

本モデルは変形を陽に解かず簡単な転位密度発展式を用いているが、微視組織とマクロな力学挙動を実用的なレベルで関係付けることができています。今後 MPF 法と結晶塑性論を練成させていきたいと考えています。

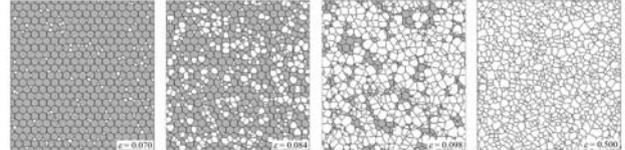


Fig.3 DRX microstructure evolutions ( $D_0 = 30 \mu\text{m}$ )

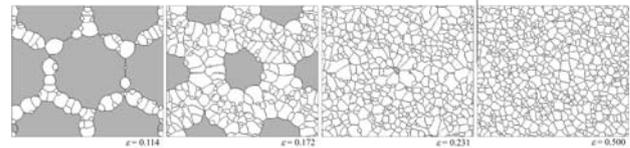


Fig.4 DRX microstructure evolutions ( $D_0 = 250 \mu\text{m}$ )

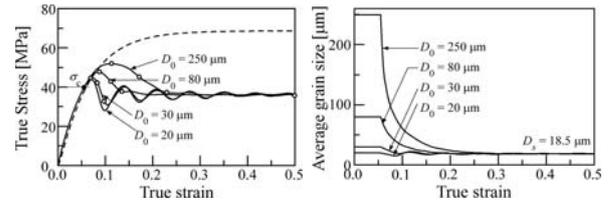


Fig.5 Stress-strain curves and variations in grain size

#### 4. おわりに

Phase-field 法が脚光を浴び始めてから 20 年になろうとしているが、中でも Multi-phase-field 法は材料組織設計を行う上で極めて汎用性の高い手法であり、また本手法に対して効率的なアルゴリズムを用いることによりパソコンレベルで実用的な組織発展シミュレーションを行うことが可能となってきた。さらに、ここで紹介したように有限要素法と連成して用いることで、塑性変形を含む複数の材料加工プロセスで形成される材料組織の履歴を考慮した体系的な材料組織設計が可能になってきたと言える。今後の発展が期待される。

#### 謝辞

Phase-field 法に関する研究の遂行にあたり 富田佳宏教授には多大なご指導とご支援を賜りました。ここに深甚な万謝をささげる次第であります。

#### 参考文献

- 1) I. Steinbach, F. Pezzolla, Physica D, 134, 385 (1999).
- 2) S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim, Y. B. Park, Phys. Rev. E, 74, 061605 (2006).
- 3) T. Takaki, A. Yamanaka, Y. Tomita, Proceedings of APCOM07, (2007).
- 4) T. Takaki, Y. Yamanaka, Y. Higa, Y. Tomita, J. Comp-Aid Mat. Design, 14, 75 (2007).
- 5) T. Takaki, T. Hirouchi, Y. Hisakuni, A. Yamanaka, Y. Tomita, Mater. Trans., (2008). in press